

学校编码: 10384

学号: 18120051301635

分类号__密级__

UDC_____

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

悬浮体系扩散特性的蒙特卡罗模拟

Study of Diffusional Properties of Suspended Systems using Monte Carlo Simulation

张婷

指导教师姓名: 吴晨旭 教授

专 业 名 称: 理 论 物 理

论文提交日期: 2008 年 月

论文答辩时间: 2008 年 月

学位授予日期: 2008 年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2008 年 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其他个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文产生的权利和责任。

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

1. 保密（），在 年解密后适用本授权书。
2. 不保密（√）

作者签名： 日期： 年 月 日

导师签名： 日期： 年 月 日

厦门大学博硕士论文摘要库

摘要

本文利用蒙特卡罗方法，构建了粒子在分布细棒和分布长链的环境中扩散的连续性模型，并相应模拟了弱导电材料中掺入纳米导电金属丝构成的混合材料系统和蛋白质分子在细胞核内的扩散行为。通过模拟粒子扩散运动和分析系统宏观扩散系数，研究了弱导电材料混合系统电导率变化情况和蛋白质分子扩散系统扩散系数的变化趋势，对比了模拟结果和理论预测，讨论了不同模型的结论及特点。细棒模型模拟结果表明，在弱导电材料中掺入的金属丝之间无相互接触的条件下，混合材料系统电导率随金属丝导电性的增加呈现常数、线形增长、常数的变化规律，并随金属丝所占体积分数的不同而变化。该结果验证了对混合材料系统电导率变化的理论预测。长链模型模拟结果显示，蛋白质分子在细胞核中扩散的系统宏观扩散系数随 DNA 链体积分数的增加和其对蛋白质分子亲和力的增大而减小。该结果与格点模型得出的结论符合较好。

关键词： 悬浮体系； 扩散； 蒙特卡罗模拟

Abstract

Diffusional properties of a system which consists of a composite of straight conducting wires, suspended isotropically in a poorly conducting medium, and the random walk of proteins inside a nucleus filled with Gaussian DNA chains is studied using Monte-Carlo simulations. The diffusion process is modeled using a random walker which moves in a continuous space with wires or chains as obstacles. The conductivity of the composite containing straight conducting wires and the macroscopic diffusion coefficient inside a matrix of Gaussian DNA chains are discussed and compared with recent theoretical scaling predictions through the analysis of the macroscopic diffusion coefficient. In the wires model, the macroscopic diffusion coefficient is closely related to the macroscopic conductivity of the suspension, which is shown to increase approximately linear with the wire conductivity at low-to moderate wire conductivities, and approaching a plateau at very high wire conductivities, additionally being a function of the volume fraction of wires. A deviation from simple theoretical scaling predictions is observed and discussed in the paper. In the Gaussian chain model, the simulations show that the macroscopic diffusion coefficient of the protein is dropping with the increase of the DNA volume fraction and with increasing protein-chain affinity. The results are shown to be consistent with those recently obtained by another group using a lattice model.

Key words: Suspended system; Diffusion; Monte Carlo simulation

厦门大学博硕士论文摘要库

目录

中文摘要	I
英文摘要	II
第一章 绪论	1
1.1 研究背景	1
1.1.1 混合物材料	1
1.1.2 细胞核中蛋白质分子的扩散	1
1.2 研究动机	4
1.3 本文结构	4
参考文献	5
第二章 模型与方法	8
2.1 模拟算法	8
2.1.1 蒙特卡罗模拟	8
2.1.2 扩散系数	9
2.2 模拟体系	11
2.2.1 细棒模型扩散体系	11
2.2.2 长链模型扩散体系	18
2.3 连续性扩散模型	20
2.3.1 细棒连续性模型	20
2.3.2 长链连续性模型	23
参考文献	26
第三章 模拟结果的分析与讨论	29
3.1 细棒模型结果分析	29
3.1.1 细棒扩散模型的宏观扩散系数	29
3.1.2 混合物系统电导率的间接分析	31

3.2	长链模型结果分析.....	34
3.2.1	长链扩散模型的宏观扩散系数	34
3.2.2	与格点模型的比较	35
	参考文献	36
第四章	结论及展望	38
附录:	作者在攻读硕士学位期间发表的论文	39
	致谢语	40

Contents

Abstract in Chinese	I
Abstract in English	II
Charter 1 Introduction	1
1.1 Background	1
1.1.1 Composite	1
1.1.2 Diffusion of proteins in nucleus	1
1.2 Research motivation	4
1.3 Structure of the paper	4
References	5
Charter 2 Models and Methods	8
2.1 Simulation algorithm	8
2.1.1 Monte Carlo simulation	8
2.1.2 Diffusion coefficient	9
2.2 Simulation systems	11
2.2.1 Stick system	11
2.2.2 Chain system	18
2.3 Continuous models	20
2.3.1 Stick model	20
2.3.2 Chain model	23
References	26
Charter 3 Results and Discussion	29
3.1 Results and discussion of stick model	29
3.1.1 Macroscopic diffusion coefficient of stick model	29
3.1.2 Derivation from conductivity of the composite	31

3.2 Results and discussion of chain model	34
3.2.1 Macroscopic diffusion coefficient of chain model	34
3.2.2 Comparison to grid model	35
References	36
Charter 4 Conclusions and Further Investigation.....	38
Appendix Publication list during M. S. Program.....	39
Acknowledgements	40

厦门大学博硕士论文摘要库

第一章 绪论

1.1 研究背景

1.1.1 混合物材料

混合物材料是由具有某些性质的材料物质悬浮于另一种溶剂物中所形成的，悬浮的物质可以是球形的，也可以是棒状的，这些物质即使在溶剂中只存在很少的数量，也能有效地改变或增强混合物材料的某些性质，使其在机械、科技等领域具有广泛的用途[1-4]。比如，悬浮在荧光物质溶液中的微粒散射能引起荧光增强现象、把单壁碳纳米管浸入某种石油沥青材料中会大大提高混合物材料的机械特性和电特性等[5-6]。人们正积极研究各种混合物材料的构建方法、传导率以及其它的特性，并进行了很多模拟和实验[7-13]。本文模拟研究的对象之一是弱导电性材料中掺入细棒状的导电金属丝所形成的混合物材料[14]，通过对相似模型的模拟能够间接分析掺入的金属丝对系统电导率的影响作用。

1.1.2 细胞核中蛋白质分子的扩散

DNA 具有双螺旋结构（图 1-1），由于它在细胞核中所占的体积分数（volume fraction）较大，因此可以把细胞核看成一个较浓密的网络[15-17]（图 1-2）。DNA 的复制需要蛋白质结合到其链上，由各种蛋白质共同作用完成（图 1-3）；基因的转录和调控也需要控制转录起始的蛋白质结合到 DNA 链相应的位点上，被转录出的 RNA 经过翻译合成蛋白质，蛋白质被运输到细胞内特定的部位或细胞外[18-19]。人们通过建立数学模型对蛋白质分子的运动进行了很多研究[20-23]。

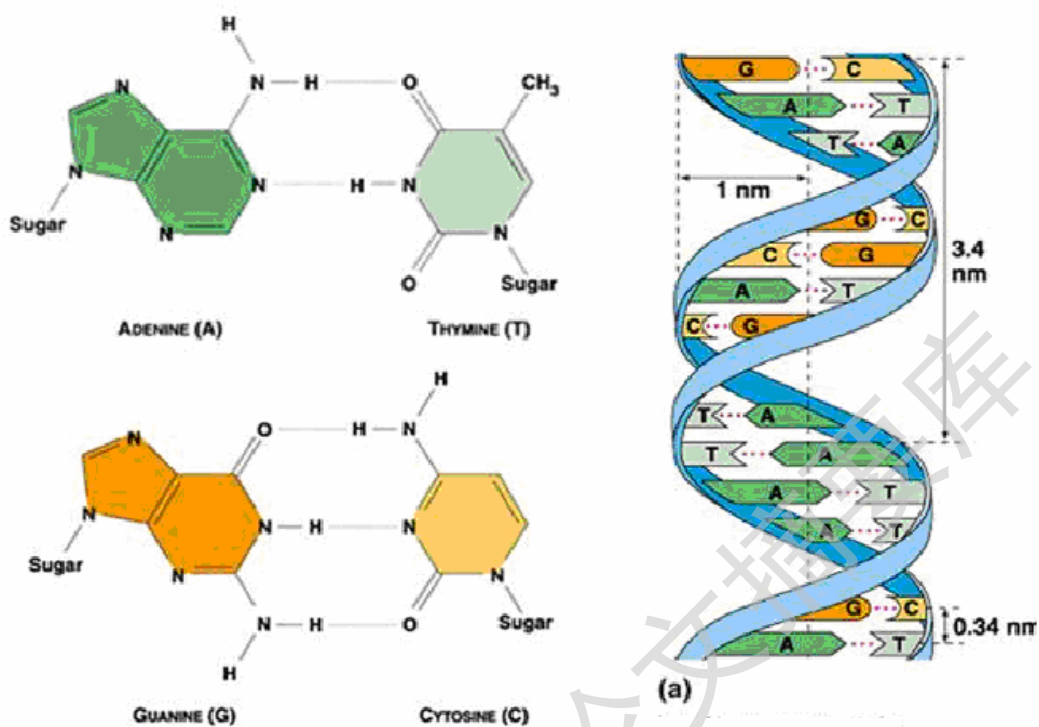


图 1-1 DNA 的双螺旋结构

资料来源:田润刚:《细胞生物学教程》[M/OL], <http://www.cella.cn>, 2004.



图 1-2 细胞核中的 DNA 链

资料来源: H. Merlitz, K.V. Klenin, C.X. Wu, et al: Facilitated diffusion of DNA-binding proteins: Efficient simulation with the method of excess collisions(MEC) [J]. J.Chem.Phys., 2006, 124: 134908. 5.

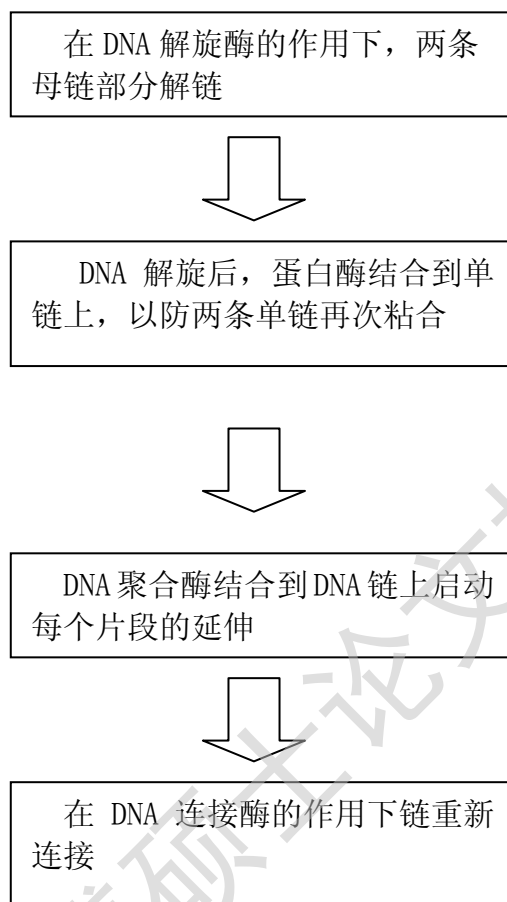


图 1-3 DNA 复制过程

资料来源：T.A. 布朗：《基因组》[M]，科学出版社，2002；D. Freifelder：《Essentials of Molecular Biology》[M]，Jones and Bartlett Publishers, 1990.

本文模拟研究的是蛋白质分子在完成上述与 DNA 链某些位点结合前在细胞核中的扩散。这种运动基本可以分为两个步骤：第一，蛋白质分子自由扩散直到随机粘贴于 DNA 链某侧；第二，沿 DNA 链滑动，这两个步骤经常会重复多次，直到蛋白质分子在 DNA 链上找到目标并结合[15, 24-27]。本文着重探讨 DNA 链对蛋白质分子扩散行为的影响，分析扩散系统扩散系数的变化规律。但本文仅模拟蛋白质分子的扩散，不设置其结合目标，蛋白质分子如何寻找到目标以结合不在本文研究范围之内。

1.2 研究动机

弱导电性材料中掺入导电金属丝构成的混合系统、蛋白质分子在细胞核内的扩散体系均能抽象为粒子在某种环境中扩散的系统。

参考文献[28]给出了弱导电材料混合系统电导率变化规律的理论预测, 本文将建立与该系统相似的悬浮细丝环境, 构建出实际框架来模拟粒子在此系统中的扩散, 从模拟结果和数据分析系统宏观扩散系数的变化趋势。该结论不仅可以间接用于分析混合材料系统电导率的变化, 也有助于对比理论预测, 以便进一步细致探讨材料性质、研究材料性能。

同时, 上述模型可修改为粒子在悬浮长链环境中扩散的系统, 用来研究蛋白质分子在细胞核中的扩散行为, 分析环境因素对扩散的影响, 明确扩散性质, 以求更好地了解和分析生物体机能。与采用格点(lattice)方法对其建模不同的是[15], 我们构建能清晰地描述系统环境和粒子扩散的连续性扩散模型, 通过模拟结果分析蛋白质分子扩散性质, 并与格点模型的方法和结果进行比较研究。

1.3 本文结构

在第一章阐述了研究的动机后, 我们在第二章第一节中将首先介绍与本文模拟相关的基础知识, 第二节中分别介绍了我们建立的两种扩散模型的体系依据和研究方法, 在第三节里, 则详细地描述了两种扩散模型及其构建过程、构建方法、参数选择、测量方式等。在第三章中, 着重对两个模型的模拟结果进行了分析和讨论, 探究其意义所在, 并与其它方法得出的推测或结论进行对比分析。本文第四章是对结论的概括提炼, 并对今后的工作方向进行初步的探讨和展望。

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库